

А. В. Кустов

ГИДРОФОБНЫЕ ЭФФЕКТЫ

**Структурные,
термодинамические,
прикладные аспекты**

**Достижения
последних лет**



URSS

ББК 22.317 24.53 24.6



*Настоящее издание осуществлено при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
(проект № 13-03-07005)*

Кустов Андрей Владимирович

Гидрофобные эффекты: Структурные, термодинамические, прикладные аспекты. Достижения последних лет. — М.: КРАСАНД, 2013. — 224 с.

В монографии собраны и проанализированы работы, посвященные теоретическому и экспериментальному исследованию гидрофобных эффектов (ГЭ). Автором отдана дань историческому аспекту изучения проблемы, перечислены основные научные школы, внесшие основополагающие вклады в развитие представлений о гидрофобной гидратации и гидрофобном взаимодействии, и дана точка зрения автора на явления, которые в научном сообществе принято объединять под термином «гидрофобные эффекты». Основное внимание в книге сосредоточено на результатах исследований, полученных за последние 20 лет методами функционала плотности, теории информации, компьютерного моделирования, рентгено- и нейтронографии. Значительное внимание уделено использованию методов химической термодинамики для экспериментального исследования ГЭ, включая собственные исследования автора. Отдельная глава посвящена практическому использованию концепции ГЭ в различных областях естествознания.

Книга должна быть полезна исследователям, работающим в области термодинамики и структуры растворов, включая растворы биологически активных веществ, физической и коллоидной химии, студентам старших курсов и аспирантам.

ИЗДАНИЕ РФФИ НЕ ПОДЛЕЖИТ ПРОДАЖЕ

Издательство «КРАСАНД». 117335, Москва, Нахимовский пр-т, 56.
Формат 60×90/16. Печ. л. 14. Подписано в печать 05.12.2013. Зак. №К-503.

Отпечатано в ОАО «ИПК «Чувашия».
428019, Чувашская Республика, Чебоксары, пр-т Ивана Яковлева, д. 13.

ISBN 978-5-396-00542-6

© А. В. Кустов, 2013

© КРАСАНД, 2013

13198 ID 176000



9 785396 005426

НАУЧНАЯ И УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА	
	E-mail: URSS@URSS.ru
	Каталог изданий в Интернете: http://URSS.ru
	Тел./факс (многоканальный): + 7 (499) 724 25 45
	URSS

Оглавление

Список принятых обозначений.....	5
Предисловие	6
Глава 1. Особенности строения жидкой воды	13
Глава 2. Структурные аспекты.....	22
2.1. Гидрофобная гидратация.....	22
2.1.1. О гидрофобности и гидрофильности	22
2.1.2. Структура гидратных оболочек молекул и ионов.....	24
2.2. Гидрофобное взаимодействие. Аналитические теории, компьютерное моделирование, дифракционный эксперимент	47
2.3. Зависимость гидрофобных эффектов от размера неполярных объектов и температуры	60
Глава 3. Термодинамические аспекты.....	78
3.1. Термодинамические функции растворения, сольватации и переноса. Вводные замечания.....	78
3.2. Концентрационные зависимости термодинамических свойств. Вириальные коэффициенты и параметры кратных взаимодействий.....	84
3.3. Термодинамические критерии гидрофобности	100
Глава 4. Гидрофобные эффекты в растворах тетраалкиламмониевых солей	112
4.1. Термодинамика гидрофобной гидратации в однокомпонентных растворителях	112

4.2. Взаимодействие тетраалкиламмониевых ионов с молекулами неэлектролитов	133
4.2.1. Энтальпийные параметры и их ионные составляющие	133
4.2.2. Температурные зависимости параметров взаимодействия.....	143
4.2.3. Зависимость энтальпийных и теплоемкостных параметров от размера катиона	153
Глава 5. Гидрофобное взаимодействие в растворах аминокислот и неэлектролитов, моделирующих их боковые фрагменты.....	161
5.1. Взаимодействие бензола и его монофункциональных производных со стабилизаторами и денатураторами глобулярных белков при 298 К	161
5.2. Алифатические и ароматические аминокислоты.....	168
5.3. Температурные зависимости параметров взаимодействия	180
Глава 6. Прикладные аспекты	192
6.1. Газовые клатратные гидраты	193
6.2. Дисперсные системы	195
6.3. Биосистемы	202
Заключение.....	215
Список литературы.....	216